

ДОМІШКОВІ СТАНИ В БАГАТОБОЗОННІЙ СИСТЕМІ

І. О. Вакарчук, Г. І. Паночко

*Кафедра теоретичної фізики Львівського національного університету імені Івана Франка,
вул. Драгоманова, 12, м. Львів, 79005, Україна
e-mail: granochko@gmail.com*

(Отримано 17 вересня 2012 р.; в остаточному вигляді — 28 грудня 2012 р.)

Досліджено основний стан моделі “бозе-рідина плюс домішковий атом” варіаційним методом з пробною хвильовою функцією в наближенні парних кореляцій. На прикладі домішки ^3He обчислено енергію занурення при різних густинах бозе-рідини. Знайдено одночастинкову матрицю густини системи.

Ключові слова: домішкові стани, колективні змінні, квантові рідини.

PACS number(s): 67.60.-g, 67.10.Hk, 61.72.Sd

І. ВСТУП

Вивчення домішкових станів у квантових рідинах починається з робіт [1, 2]. Значну увагу приділяють побудові мікроскопічної теорії для опису систем з різним типом статистики. Зокрема вивчення впливу домішок на поведінку бозе-систем є важливим завданням при дослідженні сумішей ^3He – ^4He . Актуальними є дослідження, присвячені вивченню впливу різної концентрації домішок ^3He (дефектів) на характеристики твердого ^4He [3]. Систематично проводять експерименти з виявленням конденсатної фракції для багаточастинкових систем, що перебувають у пастках [4]. На сьогодні достатньо теоретичних праць, де розглянуто газ взаємодіючих бозонів з домішковими атомами в потенціальних пастках. Автори праці [5] в наближенні середнього поля знайшли хвильову функцію основного стану системи тотожних бозонів, що є в пастці (подвійна потенціальна яма) залежно від величини бозон-домішкової взаємодії та дослідили вплив одного домішкового атома на наявність бозе-конденсату. У роботі [6] досліджено ефект тунелювання бозе-частинок у пастці у випадку сильної бозонно-домішкової взаємодії. Близькою експериментальною реалізацією цього є оптична ґратка системи багатьох бозонів плюс один домішковий атом [7]. Проте більшість робіт, у яких досліджують вплив домішкових атомів на поведінку бозе-систем, ґрунтуються на варіаційному методі, що запропонував Фінберг [9].

Домішкові стани є реперною задачею при дослідженні двокомпонентних розчинів ^3He , D_2 , Ne , Ar в надплинному гелії [8]. Зокрема, низка праць присвячена розрахункові динаміці окремих атомів ^3He в рідкому ^4He . До прикладу, у статті [9] розглянуто взаємодію одного атома ^3He з бозе-частинками при абсолютному нулі температури. Для знаходження основних характеристик такої системи (енергії занурення, ефективної маси, диференціального об'ємного коефіцієнта) автор використав теорію збурень Бріллоена–Вігнера. Вплив парних та тричастинкових кореляцій на властивості розчинів квантових рідин розглянуто в роботі [9] варіаційним методом з певним вибором функції основного стану досліджуваної системи. Завдяки певному добору пробної хвильової функції систе-

ми варіаційним методом у праці [10] отримано спектр елементарних збуджень квазічастинок розчину, який добре узгоджується з експериментальними даними, і звернуто увагу на його неквадратичну поведінку в області хвильових векторів порядку 3 \AA^{-1} . Унаслідок сильних багаточастинкових кореляцій та через велике значення ефективної маси ^3He в ^4He , яка близька до сумарної маси ^3He і ^4He , утворюються зв'язані стани атомів ^3He – ^4He , ^4He – ^4He [11]. Підтвердженням цього є експериментальні роботи [12]. У праці [13] шляхом вдалого вибору хвильової функції у вигляді добутку детермінанта Слетера, що описує фермі-систему (атоми ^3He), та множника, що враховує взаємодію між атомами ^3He і ^4He , знайдено фермі-рідинну поправку до ефективної маси. А також при різних густинах ^4He знайдено зсув матриці розсіяння в розчинах ^3He – ^4He та критичну температуру фазового переходу фермі-рідини з нормального в надплинний стан із куперівським спарюванням атомів ^3He в розчині ^3He – ^4He в границі наднизьких температур.

Для моделі “одновимірні бозони плюс домішка” в границі сильного відштовхування між бозе-частинками (δ -відштовхування) у праці [14] отримано рівняння для визначення енергії основного стану системи. Рівняння розв'язано для випадку притягання між бозе-частинками й домішковим атомом; показано існування зв'язаних станів системи. У праці [15] взаємодія між атомами ^4He та домішкою задається потенціалом Ленарда-Джонса. Для дослідження основного стану домішки в рідкому ^4He автори, скориставшись гіперланцюговим наближенням інтегральних рівнянь у теорії рідкого стану, знайшли хімічні потенціали, об'ємні коефіцієнти та кореляційні функції домішкових атомів.

Вплив позитивних йонів на поведінку бозе-рідини розглянуто в працях [16]. Зокрема, автори показали, що якщо для йонів лужних металів їхня рухливість зменшується зі збільшенням атомного номера, то для лужноземельних — навпаки, збільшується. Активно вивчають властивості домішкових атомів ^3He та ізотопів водню в плівках ^4He . Унаслідок сильної відштовхувальної взаємодії між атомами ^4He та ізотопами водню та їхньою значно меншою масою порівняно з атомами ^3He , ця система не утворює сумішей, проте

існують квазідвовимірні суміші, які вивчені з мікроскопічного погляду в роботі [17]. У праці [18] проведено оцінку вимірювання тривалості життя дейтерію в камері, стінки якої вкриті насиченим ^4He , визначено хімічний потенціал та обговорено можливість оцінки ефективної маси домішки.

Наша стаття присвячена дослідженню основного стану системи “бозе-рідина плюс домішковий атом” варіаційним методом. Стани такої системи ми постулюємо хвильовою функцією в зображенні колективних змінних. Цей метод дає змогу відтворити енергію основного стану отриманою стандартною теорією збурень як чистої бозе-рідини [19], так і розчину $^3\text{He} - ^4\text{He}$ в границі однієї домішки ^3He . Виразивши фур’є-образ потенціалу взаємодії між бозе-частинками та домішкою через статичний структурний фактор чистої бозе-рідини, у термодинамічній границі знайшли ефективну зміну об’єму. Для порівняння наведено чисельні результати, отримані методом Монте-Карло в роботі [21]. Важливими є результати щодо розподілу за імпульсами частинок системи та кількості бозе-конденсату, одержані з означення одночастинкової матриці густини системи.

II. ВИХІДНІ РІВНЯННЯ

Розгляньмо сукупність N безспінових бозе-частинок маси m з координатами $\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N$, що передбачають в об’ємі V , та домішковий атом маси M з координатою \mathbf{r} . Гамільтоніан такої модельної системи запишемо у вигляді суми: гамільтоніана бозе-рідини, кінетичної енергії домішки та енергії взаємодії домішки з частинками бозе-рідини:

$$\hat{H} = \hat{H}_B + \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2M} + \sum_{j=1}^N V(|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}|), \quad (2.1)$$

де гамільтоніан бозе-рідини:

$$\hat{H}_B = \sum_{j=1}^N \frac{\hat{\mathbf{p}}_j^2}{2m} + \frac{N(N-1)}{2V} \nu_0 + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \rho \nu_k (\rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} - 1), \quad (2.2)$$

тут ν_k — фур’є-образ потенціалу парної взаємодії $\Phi(R)$ між атомами бозе-рідини:

$$\nu_k = \int \Phi(R) e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} d\mathbf{R}, \quad (2.3)$$

$\hat{\mathbf{P}}$ — оператор імпульсу домішки, $\hat{\mathbf{p}}_j$ — оператор імпульсу j -ї бозе-частинки; $\rho = N/V$ — рівноважна густина рідини. Енергія взаємодії домішки з N атомами рідини дорівнює:

$$\sum_{j=1}^N V(|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}|) = \frac{N}{V} \bar{\nu}_0 + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \rho \bar{\nu}_k \rho_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}, \quad (2.4)$$

де

$$\bar{\nu}_k = \int V(R) e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} d\mathbf{R} \quad (2.5)$$

— коефіцієнт Фур’є енергії взаємодії домішкового атома з атомом рідини, а величини $\rho_{\mathbf{k}}$ є коефіцієнтами Фур’є флуктуації густини бозе-частинок:

$$\rho_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^N e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}_j}. \quad (2.6)$$

Нашим завданням є знайти розв’язок стаціонарного рівняння Шредингера для основного стану системи бозе-рідина плюс домішка. Для цього ми використаємо варіаційний принцип.

Виберімо хвильову функцію основного стану системи “бозе-рідина плюс домішка” у вигляді добутку хвильової функції основного стану бозонів на фактор, що враховує наявність домішки в рідині:

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, \mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{C}} \psi_B(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) e^U, \quad (2.7)$$

тут стала C забезпечує умову нормування хвильової функції на одиницю:

$$C = \int d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N \int d\mathbf{r} |\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, \mathbf{r})|^2. \quad (2.8)$$

Невідому варіаційну функцію U оберімо так, щоб вона відтворювала структуру оператора взаємодії (2.4):

$$U = \frac{1}{2\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \lambda_i(k) \rho_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}, \quad (2.9)$$

вона є дійсною додатною функцією й залежить від варіаційного параметра $\lambda_i(k)$, який ми знайдемо з умови мінімуму енергії. Варіаційну хвильову функцію основного стану бозонів $\psi_B(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$ знайдено в [19] у наближенні парних кореляцій:

$$\psi_B(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = \frac{1}{\sqrt{C_B}} \exp \left[-\frac{1}{4} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \lambda(k) \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} \right], \quad (2.10)$$

C_B — стала нормування хвильової функції рідини, а коефіцієнт $\lambda(k)$ обчислено у [19] у так званому наближенні “однієї суми за хвильовим вектором”:

$$\lambda(k) = \alpha_k - 1 + \frac{1}{2N} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1 \neq 0 \\ \mathbf{k}_2 \neq 0 \\ \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 = 0}} \left(1 - \frac{1}{\alpha_{\mathbf{k}_1}} \right) \left(1 - \frac{1}{\alpha_{\mathbf{k}_2}} \right) \times \left[\frac{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2}{k^2 \alpha_k} + \left(1 - \frac{1}{\alpha_k} \right) \right], \quad (2.11)$$

тут через α_k позначено боголюбівський фактор:

$$\alpha_k = \sqrt{1 + 2\rho \nu_k / \varepsilon_k} \quad (2.12)$$

Скориставшись зв’язком боголюбівського фактора зі структурним фактором, який означається як середньоквадратична флуктуація, в РРА-наближенні $\alpha_k = 1/S(k)$, запишемо:

$$\lambda(k) = \frac{1}{S(k)} - 1 \quad (2.13)$$

$$+ \frac{1}{2N} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1 \neq 0 \\ \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 = 0}} \sum_{\mathbf{k}_2 \neq 0} (1 - S(k_1)) (1 - S(k_2)).$$

Енергію основного стану системи, тобто власне значення гамільтоніана (2.1), шукатимемо шляхом усереднення за хвильовою функцією досліджуваної системи:

$$E = \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N \Psi^*(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, \mathbf{r}) \times \hat{H} \Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, \mathbf{r}). \quad (2.14)$$

Енергію бозе-рідини разом з домішковим атомом знаходитимемо в наближенні двох сум за хвильовим вектором — це відповідатиме другому порядку стаціонарної теорії збурень (де збуренням є потенціальна енергія взаємодії домішки з атомами рідини) [20]. Але оскільки ми у варіаційному підході беремо хвильову функцію залежну лише від одного параметра, то доданки, пов'язані з впливом домішки, враховуватимемо в наближенні однієї суми. “Домішкові” доданки порядку двох сум за хвильовим вектором не даватимуть суттєвого внеску у вираз для енергії основного стану системи.

III. ВАРІАЦІЙНА ХВИЛЬОВА ФУНКЦІЯ

Спершу запишемо сталу нормування хвильової функції (2.7) згідно з означенням:

$$C = \int d\mathbf{r}_1, \dots, d\mathbf{r}_N \int d\mathbf{r} |\psi_B(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)|^2 e^{2U}, \quad (3.1)$$

розглядаємо цей вираз, як середнє за основним станом бозе-рідини:

$$C = \langle e^{2U} \rangle_B; \quad (3.2)$$

тут ламані дужки означають таке усереднення:

$$\langle (\dots) \rangle_B = \int d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N (\dots) \psi_B^2, \quad (3.3)$$

де ψ_B нормована на одиницю. Для обчислення середнього у виразі для сталої нормування ми скористаємось розкладом за незвідними середніми:

$$\int d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N |\psi_B|^2 e^{2U} = \exp \left[\sum_{n \geq 1} \frac{M_n}{n!} \right], \quad (3.4)$$

обмежимось урахуванням лише перших кількох кумулянтів, оскільки працюємо в наближенні однієї суми за хвильовим вектором:

$$M_1 = \langle 2U \rangle_B, M_2 = \langle (2U)^2 \rangle_B - \langle 2U \rangle_B^2, \quad (3.5)$$

коли ми усереднюємо за станами рідини, то середнє $\langle 2U \rangle_B = 0$, тому третій і четвертий кумулянт запишемо так:

$$M_3 = \langle (2U)^3 \rangle_B, M_4 = \langle (2U)^4 \rangle_B - 3 \langle (2U)^2 \rangle_B^2, \dots \quad (3.6)$$

зауважимо, що ці кумулянти містять “домішкові” внески порядку двох сум. Тому:

$$C = V^N \exp \left[\frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \lambda_i^2(k) S(k) + \frac{1}{6N^2} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1 \neq 0 \\ \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3 = 0}} \sum_{\mathbf{k}_2 \neq 0} \sum_{\mathbf{k}_3 \neq 0} \lambda_i(k_1) \lambda_i(k_2) \lambda_i(k_3) S_3(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3) \right. \\ \left. + \frac{1}{8N^2} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1 \neq 0 \\ \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 = 0}} \sum_{\mathbf{k}_2 \neq 0} \lambda_i^2(k_1) \lambda_i^2(k_2) \left(\langle \rho_{\mathbf{k}_1} \rho_{-\mathbf{k}_1} \rho_{\mathbf{k}_2} \rho_{-\mathbf{k}_2} \rangle_B - S(k_1) S(k_2) \right) \right], \quad (3.7)$$

тут $S(k) = \langle \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} \rangle_B$ —рідинний парний структурний фактор, який експериментально вимірюють у дослідах із розсіяння нейтронів чи рентгенівських променів. Саме цю величину, а не потенціал міжчастинкової взаємодії, ми візьмемо як вихідну інформацію для проведення чисельних розрахунків. Також ми скористались тим, що середнє $\langle \rho_{\mathbf{k}_1} \rho_{\mathbf{k}_2} \rho_{\mathbf{k}_3} \rangle_B = \frac{1}{\sqrt{N}} S_3(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3)$ є тричастинковим структурним фактором.

Останній доданок у квадратних дужках з урахуванням розщеплення $\langle \rho_{\mathbf{k}_1} \rho_{-\mathbf{k}_1} \rho_{\mathbf{k}_2} \rho_{-\mathbf{k}_2} \rangle_B = \langle \rho_{\mathbf{k}_1} \rho_{-\mathbf{k}_1} \rangle_B \langle \rho_{\mathbf{k}_2} \rho_{-\mathbf{k}_2} \rangle_B$ дорівнюватиме нулеві, тому й надалі його не братимемо до уваги.

IV. ЕНЕРГІЯ ОСНОВНОГО СТАНУ

Середнє значення енергії основного стану нашої системи згідно з означенням (2.13), з урахуванням ви-

разу для хвильової функції (2.7) після деяких простих перетворень можна записати так:

$$\begin{aligned}
 E = & -\frac{\hbar^2}{4m} \sum_{j=1}^N \langle \nabla_j^2 U \rangle - \frac{\hbar^2}{4m} \sum_{j=1}^N \langle \nabla_j^2 \ln \psi_B \rangle \\
 & + \frac{N(N-1)}{2V} \nu_0 + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \rho \nu_k \left(\langle \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} \rangle - 1 \right) \\
 & - \frac{\hbar^2}{4M} \langle \nabla^2 U \rangle + \frac{N}{V} \bar{\nu}_0 + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \rho \bar{\nu}_k \langle \rho_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \rangle,
 \end{aligned} \quad (4.1)$$

тут середні означають усереднення за повною хвильовою функцією (2.7). Підставивши явний вигляд функції U , з (3.4), матимемо:

$$\begin{aligned}
 E = & E_B + \frac{1}{4} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \varepsilon_k \left[-\lambda(k) + 2\rho \nu_k / \varepsilon_k \right] \\
 & \times \left(\langle \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} \rangle - S(k) \right) + \rho \bar{\nu}_0 \\
 & + \frac{1}{4\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \varepsilon_k \left[\lambda_i(k) \left(1 + \frac{m}{M} \right) + 4\rho \bar{\nu}_k / \varepsilon_k \right] \langle \rho_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \rangle,
 \end{aligned} \quad (4.2)$$

де E_B — енергія основного стану бозе-рідини, яка в нульовому наближенні збігається з енергією Боголюбова:

$$E_B = \frac{N(N-1)}{2V} \nu_0 - \frac{1}{4} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \varepsilon_k \left(\alpha_k - 1 \right)^2 + \Delta E_B, \quad (4.3)$$

а поправку до цієї енергії вперше знайдено у [23], і вона дорівнює:

$$\begin{aligned}
 \Delta E_B = & \frac{1}{8N} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1 \neq 0 \\ \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3 = 0}} \sum_{\mathbf{k}_2 \neq 0} \sum_{\mathbf{k}_3 \neq 0} \varepsilon_{k_1} \left(1 - \frac{1}{\alpha_{k_1}} \right) \\
 & \times \left(1 - \frac{1}{\alpha_{k_2}} \right) \left(1 - \frac{1}{\alpha_{k_3}} \right).
 \end{aligned} \quad (4.4)$$

Запишемо повні середні $\langle \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} \rangle$, $\langle \rho_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \rangle$, що входять у вираз для енергії основного стану (4.2), через

варіаційні похідні від сталої нормування (3.1):

$$\langle \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} \rangle = \frac{\delta^2 C}{\delta \lambda_i(k) \delta \lambda_i(-k)}, \quad (4.5)$$

$$\langle \rho_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \rangle = \sqrt{N} \frac{\delta \ln C}{\delta \lambda_i(k)}. \quad (4.6)$$

Обчисливши їх, отримаємо:

$$\begin{aligned}
 \langle \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} \rangle = & S(k) + \frac{1}{N} \lambda_i^2(k) S^2(k) + \frac{1}{N^2} \lambda_i(k) S(k) \\
 & \times \sum_{\substack{\mathbf{k}_1 \neq 0 \\ \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 = 0}} \sum_{\mathbf{k}_2 \neq 0} \lambda_i(k_1) \lambda_i(k_2) S_3(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}); \\
 \frac{1}{\sqrt{N}} \langle \rho_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \rangle = & \left[\frac{1}{N} \lambda_i(k) S(k) \right. \\
 & \left. + \frac{1}{2N^2} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1 \neq 0 \\ \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 = 0}} \sum_{\mathbf{k}_2 \neq 0} \lambda_i(k_1) \lambda_i(k_2) S_3(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3) \right].
 \end{aligned} \quad (4.7)$$

Підставивши одержані повні середні у вираз (4.2), матимемо енергію основного стану системи, залежну від варіаційного параметра, який шукатимемо з умови мінімуму енергії:

$$\frac{\delta E}{\delta \lambda_i(k)} = 0. \quad (4.8)$$

У результаті розв'язку цього рівняння отримаємо:

$$\lambda_i(k) = -\frac{2\rho \bar{\nu}_k / \varepsilon_k}{1 + m/M + S(k)[2\rho \nu_k / \varepsilon_k - \lambda(k)]}, \quad (4.9)$$

а сама енергія основного стану системи “рідина плюс домішковий атом” у наближенні двох сум за хвильовим вектором, з урахуванням цього виразу, буде такою:

$$\begin{aligned}
 E = & E_B - \frac{1}{4N} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \varepsilon_k \frac{(2\rho \bar{\nu}_k / \varepsilon_k)^2 S(k)}{1 + m/M + S(k)[2\rho \nu_k / \varepsilon_k - \lambda(k)]} + \frac{N}{V} \bar{\nu}_0 \\
 & - \frac{1}{8N^2} \left(1 + \frac{m}{M} \right) \sum_{\substack{\mathbf{k}_1 \neq 0 \\ \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3 = 0}} \sum_{\mathbf{k}_2 \neq 0} \sum_{\mathbf{k}_3 \neq 0} \lambda_i(k_1) \lambda_i(k_2) \lambda_i(k_3) S_3(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3).
 \end{aligned} \quad (4.10)$$

Для аналізу цікавішою є енергія занурення домішки в бозе-рідину, що є різницею цієї повної енергії E та енергії чистої рідини E_B , позначатимемо цю величину E_i . Головним доданком в енергії занурення є той, що містить одну суму за хвильовим вектором.

Варіаційний параметр, з урахуванням нульового наближення для коефіцієнта $\lambda(k) = \alpha_k - 1$, запишемо так:

$$\lambda_i(k) = -\frac{2\rho \bar{\nu}_k / \varepsilon_k}{\alpha_k + m/M} \quad (4.11)$$

і відповідно, енергія занурення:

$$\begin{aligned}
 E_i = & \rho \bar{\nu}_0 - \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \varepsilon_k \frac{(\rho \bar{\nu}_k / \varepsilon_k)^2}{\alpha_k (\alpha_k + m/M)} \\
 & + \frac{1}{N^2} \left(1 + \frac{m}{M}\right) \sum_{\substack{\mathbf{k}_1 \neq 0 \\ \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3 = 0}} \sum_{\mathbf{k}_2 \neq 0} \sum_{\mathbf{k}_3 \neq 0} \varepsilon_{k_1} \frac{\rho \bar{\nu}_{k_1} / \varepsilon_{k_1}}{\alpha_{k_1} + m/M} \frac{\rho \bar{\nu}_{k_2} / \varepsilon_{k_2}}{\alpha_{k_2} + m/M} \frac{\rho \bar{\nu}_{k_3} / \varepsilon_{k_3}}{\alpha_{k_3} + m/M} S_3(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3).
 \end{aligned} \tag{4.12}$$

Оскільки наша досліджувана система складається з N бозе-частинок та одного домішкового атома, то замінимо цей атом частинкою того ж сорту, що й частинки рідини, тоді енергію системи $N + 1$ бозе-частинок розкладемо в ряд за N і одержимо так звану енергію заміщення системи:

$$\Delta E = E_i - \left(\frac{\partial E_B}{\partial N} \right)_T,$$

яка в явному вигляді в наближенні однієї суми за хвильовим вектором дорівнює:

$$\Delta E = -\frac{1}{4N} \left(1 - \frac{m}{M}\right) \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \varepsilon_k \frac{(2\rho \bar{\nu}_k / \varepsilon_k)^2}{\alpha_k (\alpha_k + 1)} \frac{1}{\alpha_k + m/M}.$$

Використовуючи вираз для повної енергії системи, можна отримати рівняння стану системи. Для чистої бозе-рідини воно є відомим, а почисливши похідну від енергії занурення в наближенні однієї суми за хвильовим вектором, оскільки ми працюємо в наближенні парних кореляцій, матимемо зміну тиску при наявності в системі домішки. Власне, саме з тим тиском пов'язаний коефіцієнт

$$\alpha = \frac{\rho}{mc^2} \left(\frac{\partial \Delta E}{\partial \rho} \right)_T, \tag{4.13}$$

який дає змогу оцінити ефективну зміну об'єму в системі "бозе-рідина плюс домішка", коли замінити один атом ${}^4\text{He}$ домішковим атомом при сталій температурі, тобто

$$\alpha = -\frac{V}{mc^2} \left(\frac{\partial \Delta E}{\partial V} \right)_T, \tag{4.14}$$

підставивши у (4.14) ΔE , одержимо:

$$\begin{aligned}
 mc^2 \alpha = & -\frac{1}{8N} \left(1 - \frac{m}{M}\right) \\
 & \times \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \varepsilon_k \frac{(2\rho \bar{\nu}_k / \varepsilon_k)^2}{\alpha_k^3} \left(1 - \frac{\alpha_k (\alpha_k - 1)}{\alpha_k + m/M}\right).
 \end{aligned} \tag{4.15}$$

Зауважимо, що означений у такий спосіб коефіцієнт α збігається з коефіцієнтом α у праці [21] і після перетворень збігається з формулою, яку запропонував Бейм [1]:

$$\alpha = \frac{\rho}{mc^2} \left(\frac{\partial E_i}{\partial \rho} \right)_T - 1, \tag{4.16}$$

$$\begin{aligned}
 mc^2 \alpha = & E_i - mc^2 + \frac{1}{8N} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \varepsilon_k \left(\alpha_k - \frac{1}{\alpha_k} \right)^3 \\
 & \times \frac{2\alpha_k + m/M}{(\alpha_k + m/M)^2}.
 \end{aligned} \tag{4.17}$$

V. ЧИСЕЛЬНІ РЕЗУЛЬТАТИ

Для чисельної оцінки енергії занурення запишімо фур'є-образ потенціалу взаємодії між бозе-рідиною та домішкою $\bar{\nu}_k$ через боголюбівський фактор α_k чи через парний структурний фактор чистої бозе-рідини. Тобто прийнемо, що $\nu_k = \bar{\nu}_k$ для домішки ${}^3\text{He}$. Таке припущення буде правдивим для елементів, у яких повністю заповнена s -оболонка (насамперед, це інертні гази). Для іншого типу домішок не завжди можна забезпечити рівність цих коефіцієнтів, оскільки не для всіх потенціалів взаємодії існує фур'є-образ (для взаємодії типу Ленарда-Джонса його потрібно доозначувати). Коефіцієнт Фур'є взаємодії $\bar{\nu}_0$ при $k \rightarrow 0$ виразимо через швидкість першого звуку в рідкому ${}^4\text{He}$ (при $T = 0 \text{ K}$ $c = 238.2 \text{ м/с}$ $\rho_0 = 0.0218 \text{ Å}^{-3}$), як у випадку виключення фур'є-образу потенціалу взаємодії між бозе-частинками ν_0 , використовуючи співвідношення:

$$mc^2 = N \frac{\partial^2 E_B}{\partial N^2},$$

після обчислення похідної, беручи до уваги лише нульове наближення для енергії чистої рідини (4.3), отримаємо зв'язок між швидкістю звуку та фур'є-образом потенціалу взаємодії $\bar{\nu}_0$:

$$\bar{\nu}_0 = \frac{mc^2}{\rho} + \frac{1}{16\pi^2 \rho^2} \int_0^\infty k^2 \varepsilon_k S(k) \left(S(k) - \frac{1}{S(k)} \right)^2 dk. \tag{5.1}$$

Зрозуміло, що для густин, не рівних рівноважній густині ρ_0 рідкого гелію, а відповідно й іншого значення швидкості звуку, Фур'є-образ $\bar{\nu}_0$ є мікроскопічним параметром і має залишатися сталим. Не змінюватиметься також коефіцієнт $\bar{\nu}_k$ залежно від густини бозе-рідини.

При чисельних розрахунках енергії занурення для густин не рівних рівноважній густині ρ_0 рідкого гелію, доцільно перенормувати боголюбівський фактор у виразі для енергії занурення (4.12). Ця процедура полягає в його перерахунку через експериментально вимірюваний структурний фактор $S_{\text{exp}}(k)$ у дослідках з розсіяння нейтронів при нормальній густині ρ_0 гелію-4 [24]. Отже:

$$\alpha_k^2 = 1 + \frac{\rho}{\rho_0} \left(\frac{1}{S_{\text{exp}}^2(k)} - 1 \right). \tag{5.2}$$

Оскільки ми працюємо в наближенні парних кореляцій, то структурний фактор при інших густинах дорівнює:

$$\frac{1}{S^2(k)} = 1 + \frac{\rho}{\rho_0} \left(\frac{1}{S_{\text{exp}}^2(k)} - 1 \right). \quad (5.3)$$

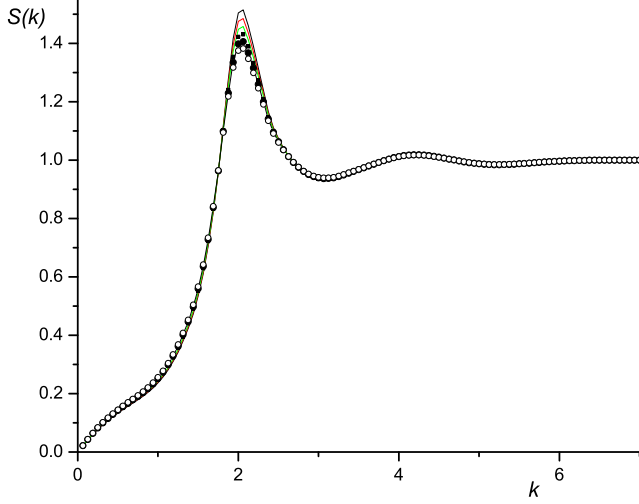


Рис. 1. Перенормований структурний фактор ${}^4\text{He}$ при різних густинах (виколотими кружечками позначено експериментально виміряний структурний фактор за нормальних умов рідкого гелію).

Отже, у термодинамічній границі ($N \rightarrow \infty, V \rightarrow \infty; \rho = \text{const}$) при переході від підсумовування до інтегрування за всіма хвильовими векторами $\sum_{\mathbf{k} \neq 0}(\dots) \rightarrow V/(2\pi)^3 \int(\dots)d\mathbf{k}$ енергію занурення запишемо так:

$$E_i = \rho \bar{v}_0 - \frac{1}{8\pi^2 \rho} \int_0^\infty k^2 \varepsilon_k \frac{(1 - S^2(k))^2}{S^3(k)(1/S(k) + m/M)} dk + \Delta E_i, \quad (5.4)$$

тут ΔE_i — поправка до енергії занурення порядку двох сум за хвильовим вектором. Для її обчислення потрібно скористатися конволюційним наближенням для структурного фактора, коли тричастинковий структурний фактор розщеплюють на парні структурні фактори бозе-рідини: $S(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3) = S(k_1)S(k_2)S(k_3)$. Узагалі кажучи, така факторизація нівелює вплив три- та чотиричастинкових кореляцій, але ми в розрахунках урахуємо лише парні кореляції. Тому:

$$\Delta E_i = \frac{1}{64\pi^4 \rho^2} \left(1 + \frac{m}{M}\right) \int_0^\infty k_1 dk_1 \int_0^\infty k_2 dk_2 \times \int_{|k_1 - k_2|}^{k_1 + k_2} k dk f(k, k_1, k_2),$$

де

$$f(k, k_1, k_2) = \varepsilon_k \frac{1/S^2(k) - 1}{1/S(k) + m/M} \frac{1/S^2(k_1) - 1}{1/S(k_1) + m/M} \times \frac{1/S^2(k_2) - 1}{1/S(k_2) + m/M}$$

— внесок цього доданка у вираз для енергії порядку 0.001 К, тому надалі не братимемо його до уваги.

Зауважимо, що у формулі (5.4) структурний фактор беремо з (5.2), а обчислюючи коефіцієнт \bar{v}_0 , вважати- мемо, що $\rho = \rho_0$ і $S(k) = S_{\text{exp}}(k)$ для всіх густин.

Аналогічно в термодинамічній границі можна записати енергію заміщення:

$$\Delta E = -\frac{1}{8\pi^2 \rho} \left(1 - \frac{m}{M}\right) \int_0^\infty k^2 \varepsilon_k S(k) [1/S(k) - 1]^2 \times \frac{1/S(k) + 1}{1/S(k) + m/M} dk. \quad (5.5)$$

В експериментальних роботах зазвичай вимірюють енергію розділення B , яка у праці [9] для системи $(N - 1)$ бозе-частинок та одного домішкового атома означено як різницю повної енергії цієї системи, порохованої теорією збурень Бріллоена–Вігнера, та енергії бозе-рідини з розрахунком на одну частинку за сталої густини, тобто це та енергія, яка потрібна для видалення домішкового атома з розчину ${}^3\text{He} - {}^4\text{He}$. При рівноважній густині $\rho_0 = 0.0218 \text{ \AA}^{-3}$ її значення для однієї домішки ${}^3\text{He}$ дорівнює $B^{\text{exp}} = 2.76 \text{ К}$.

Мовою наших позначень зв'язок між енергіями розділення та занурення таких:

$$-B = \Delta E + E_B/N.$$

Наводимо чисельні результати для енергій у випадку домішки ${}^3\text{He}$:

$\rho, \text{ \AA}^{-3}$	$E_B/N, \text{ К}$	$E_i, \text{ К}$	$\Delta E, \text{ К}$	$B, \text{ К}$	$B^{[9]}, \text{ К}$
0.0218	-5.21	8.70	3.19	2.02	1.39
0.0226	-5.30	9.66	3.25	2.05	1.15
0.0234	-5.39	10.71	3.30	2.09	0.88
0.0242	-5.44	11.77	3.35	2.09	0.51
0.0250	-5.46	12.82	3.41	2.05	0.13
0.0258	-5.45	13.88	3.47	1.98	-0.36

VI. РОЗПОДІЛ ЗА ІМПУЛЬСАМИ

Насамперед знайдемо одночастинкову матрицю густини системи згідно з означенням:

$$F_1(\mathbf{r}|\mathbf{r}') = \frac{V}{Z_N} \int d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N \times \Psi^*(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, \mathbf{r}') \Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, \mathbf{r}), \quad (6.1)$$

тут Z_N — статистична сума системи “бозе-рідина плюс домішка”:

$$Z_N = \int d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N \int d\mathbf{r} \times \Psi^*(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, \mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, \mathbf{r}). \quad (6.2)$$

Для цього врахуємо явний вигляд хвильової функції та розрахуємо інтеграл (6.1), усереднюючи за станами бозе-рідини:

$$F_1(R) = \exp \left[\frac{1}{4N} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \lambda_i^2(k) S(k) (\cos \mathbf{kR} - 1) + \frac{1}{8N^2} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1 \neq 0 \\ \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3 = 0}} \sum_{\mathbf{k}_2 \neq 0} \sum_{\mathbf{k}_3 \neq 0} \lambda_i(k_1) \lambda_i(k_2) \lambda_i(k_3) S_3(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3) (\cos \mathbf{k}_1 \mathbf{R} - 1) \right], \quad (6.3)$$

тут $\mathbf{R} = \mathbf{r} - \mathbf{r}'$.

Якщо припустити, що взаємодія між атомами рідини є такою ж, що й між бозе-частинками, тобто ($\bar{\nu}_k = \nu_k$), і покласти, що їхні маси рівні ($M = m$), то обчислена одночастинкова матриця густини збігається з одночастинковою матрицею багатобозонної системи, отриманою в роботі [19] у наближенні парних кореляцій.

Зауважимо, що $F_1(0) = 1$, а коли ж у виразі для матриці густини спрямувати $R \rightarrow \infty$, то

$$F_1(\infty) = \exp \left[-\frac{1}{4N} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \lambda_i^2(k) S(k) - \frac{1}{8N^2} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1 \neq 0 \\ \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3 = 0}} \sum_{\mathbf{k}_2 \neq 0} \sum_{\mathbf{k}_3 \neq 0} \lambda_i(k_1) \lambda_i(k_2) \lambda_i(k_3) S_3(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3) \right]. \quad (6.4)$$

Якщо домішковий атом — це частинка такої ж маси, що й частинки бозе-рідини, то розклад у ряд експоненти в лінійному наближенні формально збігається з кількістю бозе-конденсату в рідкому гелії:

$$F_1(\infty) = 1 - \frac{1}{4N} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \frac{(1 - \alpha_k)^2}{\alpha_k}.$$

Такий вираз можна отримати, обчисливши варіаційну похідну за вільночастинковим спектром домішки $\hbar^2 k^2 / 2M$ від вільної енергії системи, яка при абсолютному нулі температури збігається з енергією основного стану системи “бозе-рідина плюс домішка” (5.4). На рис. 2 зображено поведінку функції $F_1(R)$.

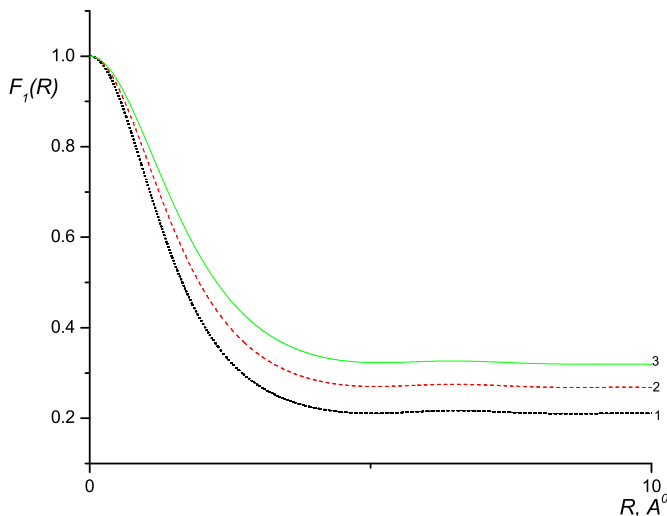


Рис. 2. Одночастинкова матриця густини системи “бозе-рідина плюс домішковий атом” порівнянно з матрицею густини чистої бозе-рідини (суцільна лінія): 1 — для домішки ${}^6\text{He}$, 2 — для домішки ${}^3\text{He}$.

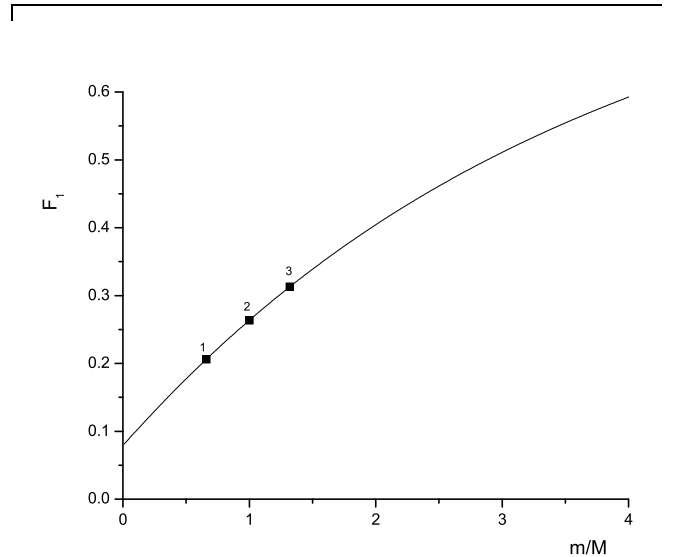


Рис. 3. Імовірність знайти домішковий атом з нульовим імпульсом. Точки: 1. — ${}^6\text{He}$, $F_1(\infty) = 0.21$; 2. — ${}^4\text{He}$, $F_1(\infty) = 0.26$; 3. — ${}^3\text{He}$, $F_1(\infty) = 0.31$.

Для знаходження густини ймовірності того, що домішковий атом має імпульс $\hbar \mathbf{q}$, запишімо фур'є-образ одночастинкової матриці густини:

$$\omega_{\mathbf{q}} = \int e^{i\mathbf{qR}} F_1(R) d\mathbf{R}, \quad (6.5)$$

забезпечмо збіжність цього інтеграла, додавши та віднявши значення одночастинкової матриці на безмежності:

$$\omega_{\mathbf{q}} = \int e^{i\mathbf{qR}} [F_1(R) - F_1(\infty)] d\mathbf{R} + (2\pi)^3 \delta(\mathbf{q}) F_1(\infty), \quad (6.6)$$

тоді перший доданок — це густина ймовірності того, що домішковий атом має хвильовий вектор $\mathbf{q} \neq 0$. Підсумування за всіма хвильовими векторами \mathbf{q} дає

повну ймовірність знайти частинку в просторі хвильових векторів:

$$\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}} \omega_{\mathbf{q}} = 1. \quad (6.7)$$

Підставмо сюди розподіл $\omega_{\mathbf{q}}$ і запишімо ймовірність знайти домішковий атом із імпульсом, відмінним від нуля:

$$p = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \int e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}} [F_1(R) - F_1(\infty)] d\mathbf{R}, \quad (6.8)$$

а тоді величину $F_1(\infty)$ трактуватимемо як імовірність того, що домішковий атом має імпульс, рівний нулеві. Для знаходження ймовірності того, що частинка є в стані спокою, обчислімо її значення (6.4), виходячи з тих міркувань, що й при розрахунку енергії занурення. Зобразимо графічно (рис. 1) залежність імовірності знайти домішковий атом з нульовим імпу-

льсом для різних співвідношень між масами домішкових атомів. У важких домішках (атомна маса зростає зі збільшенням атомного номера елемента в періодичній системі) відношення $m(^4\text{He})/M \simeq 0.01$ і величина $F_1(\infty)$ є суттєво малими. Якщо домішка — це атом ^4He (відношення мас дорівнює одиниці), то це є своєрідною перевіркою для значення відносної кількості бозе-конденсату чистого гелію $F_1(\infty) = 0.26$.

Чисельно оцінімо розподіл за імпульсами для різних значень мас домішкового атома. Для початку у виразі (6.8) перейдімо від підсумовування за хвильовим вектором \mathbf{q} до інтегрування та спростимо його:

$$p = \frac{1}{2\pi^2} \int_0^\infty q dq \int_0^\infty R \sin qR [F_1(R) - F_1(\infty)] dR. \quad (6.9)$$

Чисельні результати для ймовірності знайти домішковий атом з не нульовим імпульсом є такими: $p = 0.74$ (для домішки ^4He); $p = 0.69$ (для домішки ^3He); $p = 0.80$ (для домішки ^6He).

-
- [1] J. Bardeen, G. Baym, D. Pines, Phys. Rev. **156**, 207 (1967).
 [2] Chai-Wei Woo, Hing-Tat Tan, W. E. Massey, Phys. Rev. **185**, 287 (1969).
 [3] S. A. Vitiello, R. Pessoa, in *International Conference on Quantum Fluids and Solids 2012, 15th–21st August 2012. Conference Handbook* (Lancaster University, UK), p. 46.
 [4] M. Albiez, R. Gati, J. Fölline, S. Hunsmann, M. Cristiani, Phys. Rev. Lett. **95**, 010402 (2005).
 [5] F. Mulansky, J. Mumford, D. H. J. O’Dell, Phys. Rev. A **84**, 063602 (2011).
 [6] M. Rinek, C. Bruder, Phys. Rev. A **83**, 023608 (2011).
 [7] S. Will, T. Best, S. Braum, U. Scheider Phys. Rev. Lett. **106**, 115305 (2011).
 [8] Г. О. Балабанян, Теор. мат. физ. **66**, 121 (1986).
 [9] T. V. Davison, E. Feenberg, Phys. Rev. **178**, 306 (1969).
 [10] В. А. Слюсарев, М. О. Стржемечний, Укр. фіз. журн. **14**, 450 (1969).
 [11] С. И. Вильчинский, С. А. Пашицкий, П. И. Фомин, Физ. низк. темп. **23**, 1267 (1997).
 [12] R. Simonsand, R. M. Mueller, Czech. J. Phys. Suppl. **46**, 201 (1996).
 [13] С. А. Пашицкий, Физ. низк. темп. **25**, 115 (1999).
 [14] Г. Е. Гургенишвили, Г. А. Харадзе, Л. А. Чабанян, Теор. мат. физ. **25**, 275 (1975).
 [15] K. E. Kurten, M. L. Ristig, Nuovo Cimento D **2**, 1057 (1983).
 [16] M. W. Cole, R. A. Bachman, Phys. Rev. B **15**, 1388 (1977).
 [17] E. Krotscheck, M. Saarela, J. L. Epstein, Phys. Rev. B **38**, 111 (1988).
 [18] M. W. Reynolds, M. E. Hayden, W. N. Hardy, J. Low Temp. Phys. **84**, 87 (1991).
 [19] И. А. Вакарчук, Торе. мат. физ. **32**, 247 (1977).
 [20] І. О. Вакарчук, *Квантова механіка* (ЛНУ ім. І. Франка, Львів, 2012).
 [21] J. Boronat, J. Casulleras, preprint arxiv.cond-mat/9807273v1 (1998).
 [22] Н. Н. Боголюбов, Изв. АН СССР. Сер. физ. **11**, 77 (1947).
 [23] Н. Н. Боголюбов, Д. Н. Зубарев, Журн. эксп. теор. физ. **28**, 129 (1955).
 [24] H. N. Robkoff, R. B. Hallock, Phys. Rev. B **24**, 159 (1981).

IMPURITY STATES IN A MANY-BOSON SYSTEM

I. O. Vakarchuk, G. I. Panochko

*Department for Theoretical Physics, Ivan Franko National University of Lviv,
 12, Drahomanov St., Lviv, UA-79005, Ukraine*

The ground state of the model “Bose-liquid + impurity atom” is studied in the approximation of pair correlations using the variational method with a trial wave function. With ^3He impurity as an example, the immersion energy at different densities of the Bose-liquid is calculated. The one-particle density matrix of the system “Bose-liquids + impurity” is found.